

# 강 의 계 획 서

교과목 정 보	교과목명	전산재료원론 <input type="checkbox"/> 2학점 <input checked="" type="checkbox"/> 3학점		수업년도(학기)	2016년 1학기	
	소 속	응용화학과		성 명	이상욱	
	강의요일	미정		강의시간	미정	
	강의장소	미정				
교과목 개 요	현대 과학 기술은 원자, 전자 수준에서의 미시적 거동에 기반하여 발달해오고 있다. 따라서, 현대 과학의 이해를 위해서는 양자역학의 이해가 필수적이다. 본 과목에서는 양자역학에 대한 이론과 양자역학 기반의 전산재료에 대해 학습하고자 한다.					
수업목표	본 과목에서는 원자, 전자 수준의 미시적 세계를 지배하는 양자역학의 원리를 이해하고, 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 물질의 물리화학적 특성을 전자수준에서 이해하는 것을 최종 목표로 한다.					
교 재	교재명		저자		출판사	
평가방법	중간(%)	기말(%)	출석(%)	과제(%)	수업참여도(%)	기타(%)
	0	0	20	50	30	
주 별 강 의 계 획	주차	Contents			Exam & 과제	
	Week 1	Computational Materials Science (CMS)				
	Week 2	Linux1: Introduction / File & Directory management				
	Week 3	Linux2: Emacs				
	Week 4	CMS1: Molecular Mechanics / PES / MS				
	Week 5	CMS2: Qunatum Mechanics & Hatree-Fock				
	Week 6	CMS3: Gaussian09 & WebMO				
	Week 7	CMS4: Basis Set & Density Functional Theory				
	Week 8	CMS5: MS modeling & several modules				
	Week 9	CMS6: G09 Practice				
	Week 10	Linux3: Shell & File permission				
	Week 11	Linux4: Process & User Command & File archive				
	Week 12	Linux5: Linux Utility				
	Week 13	Linux6: Shell script				
	Week 14	CMS7: Solid State & Band Structure				
	Week 15	CMS8: VASP1				
	Week 16	CMS8: VASP2				